

N° d'enregistrement

au C.N.R.S.

A.O. 3246

ARTICLE PRINCIPAL

Recouvrant en partie

LA THESE DE DOCTORAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

présentée

A LA FACULTE DES SCIENCES

de PARIS

par

Jean-Paul MORNON

pour obtenir

le grade de Docteur Es-Sciences

Sujet de la Thèse : DETERMINATION DE STRUCTURES CRISTALLINES PAR LA
METHODE D'ADDITION SYMBOLIQUE

soutenue le 19 mai 1969 devant la Commission d'Examen

MM. WYART

CURIEN

von ELLER

MOLHO

Président

} Examinateurs



Acta Cryst. (1967). **23**, 367

**Application de la Méthode d'Addition Symbolique:
Structure Cristalline de l'Acide *N*- α -Naphtyltetrahydro-1,2,3,6-phtalamique**

PAR J. P. MORNON

Laboratoire des Rayons X, IRCHA, 12 Quai Henri IV, Paris 4^e

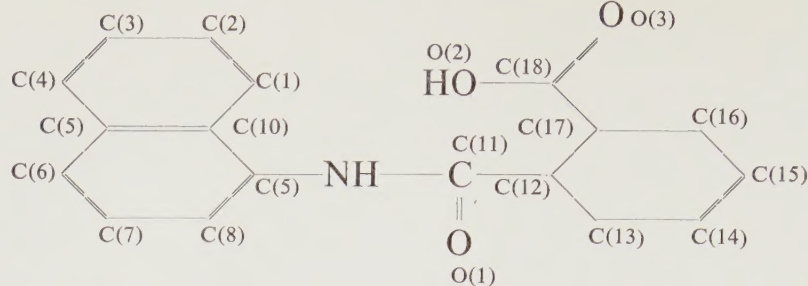
(Reçu le 23 février 1967)

The symbolic addition method has been used to determine the crystal structure of *N*- α -naphthyl-1,2,3,6-tetrahydrophthalamic acid. The material crystallizes in the space group $P2_1/c$ with cell dimensions $a = 17.43$, $b = 4.97$, $c = 22.90$ Å, $\beta = 132^\circ$. A comparison on structural aspects is made with *N*- α -naphthyl-4-chlorophthalamic acid.

Introduction

La détermination des structures cristallines de plusieurs acides arylphtalamiques a été entreprise pour contribuer à l'explication de leur mode d'action sur les végétaux. En effet certains de ces composés inversent

le sens du géotropisme de racines végétales (Mentzer, Molho & Pacheco, 1950). Cette résolution de structure par application de la méthode d'addition symbolique fait suite à celle de l'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phtalamique (Mornon, 1966). L'acide *N*- α -naphtyl-tetrahydro-1,2,3,6-phtalamique a pour formule:



Ce travail a déjà fait l'objet d'une courte note (Mornon, 1967).

Partie expérimentale

L'acide *N*-α-naphtyl-tétrahydro-1,2,3,6-phthalamique cristallise dans le système monoclinique en plaquettes incolores. Les paramètres de la maille déterminés sur chambre de Weissenberg ont pour valeurs:

$$a = 17,43 \pm 0,03, \quad b = 4,97 \pm 0,015, \quad c = 22,90 \pm 0,04 \text{ \AA} \\ \beta = 132 \pm 0,3^\circ; \quad (V = 1475 \text{ \AA}^3).$$

Le groupe spatial est $P2_1/c$ avec $Z=4$; la densité calculée possède la valeur $D_c = 1,31 \text{ g.cm}^{-3}$. Les intensités diffractées ont été recueillies par la technique habituelle des films multiples sur chambre de Weissenberg intégrante et non intégrante avec la radiation $\text{Cu K}\alpha$. Les intensités indépendantes, au nombre de 2850, ont été lues au moyen d'un densitomètre et d'une échelle étalonnée.

Après corrections par les facteurs de Lorentz et de polarisation les intensités observées ont été placées à l'échelle absolue par la méthode de Wilson et les facteurs de structure normalisés $|E_H|$ ont été calculés.

Pour le groupe $P2_1/c$ $|E_H|^2 = |F_H|^2 / \sum_{j=1}^N \varepsilon f_{jH}^2$ avec $\varepsilon = 1$ sauf pour les réflexions $h0l$ et $0k0$ pour lesquelles sa valeur est 2.

Cette structure donne la distribution suivante: 0,7% $|E| > 3$; 4,5% $|E| > 2$; 31,5% $|E| > 1$; contre théoriquement 0,3%, 5%, 32% pour une distribution atomique uniforme dans un cristal centrosymétrique.

Détermination des phases des facteurs de structure

La structure a été résolue comme celle de l'acide *N*-α-naphtylchloro-4-phthalamique par application de la méthode d'addition symbolique (Karle & Karle, 1966). L'origine a été fixée par le choix des signes de trois réflexions linéairement indépendantes et il a été attribué les signes symboliques a, b, c, d à quatre réflexions dans les premières étapes de l'application de la formule Σ_2 : $sE_H \approx s \sum_K E_K E_{H-K}$, H et K tridimensionnels. Il est

nécessaire que les réflexions composant la séquence de départ (Tableau 1) aient des modules $|E|$ élevés pour assurer des probabilités acceptables au cours des étapes initiales. Elles doivent également posséder un grand nombre d'interactions $H, K, H-K$ intervenant dans

Σ_2 . La détermination des signes est contrôlée par la formule de probabilité

$$P_+(E_H) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\sigma_3}{\sigma_2^{3/2}} |E_H| \sum_K E_K E_{H-K} \text{ avec } \sigma_n = \frac{\sum_{j=1}^N Z_j^n}{N}$$

Z étant le numéro atomique de l'atome j , la maille contenant N atomes.

Tableau 1. Séquence de départ

H	s	$ E_H $
$\bar{2} \ 1 \ 7$	+	2,68
$3 \ 2 \ 8$	+	3,00
$\bar{3} \ 3 \ 12$	+	2,95
$\bar{2} \ 1 \ 4$	a	2,40
$6 \ 3 \ 3$	b	3,28
$\bar{1} \bar{4} \ 0 \ 6$	c	3,25
$\bar{1} \bar{7} \ 2 \ 16$	d	2,90

De nombreuses relations intervenant entre symboles firent admettre comme très probables les égalités $a = -c = +1$. Quatre séquences de signes restaient alors possibles. La faible valeur du paramètre b a permis d'effectuer un choix par exploitation des termes $h0l$. La séquence $a = b = d = -c = +1$ apparut être la bonne solution. Elle satisfait de façon importante la cohérence interne par rapport à Σ_2 .

Les sections de Fourier normales à b ont alors été effectuées sur photosommateur avec 367 facteurs de structure normalisés dont les signes venaient ainsi d'être déterminés. La quasi-totalité d'entre eux possède des modules supérieurs à 1,5. Les photosommes

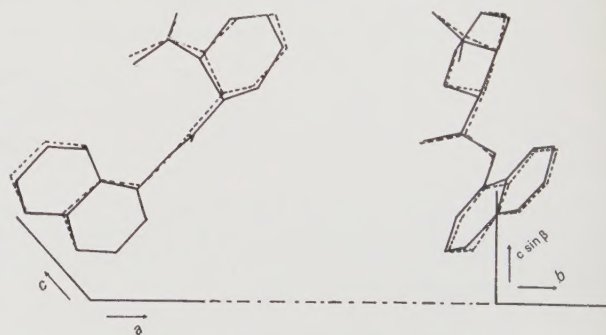


Fig. 3. Projections selon les axes b et a de l'unité asymétrique. Le contour en pointillé indique le résultat des sections photosommées calculées à partir des 367 E dont les signes ont été obtenus par la méthode d'addition symbolique. Le contour en traits pleins correspond à la molécule après affinement.

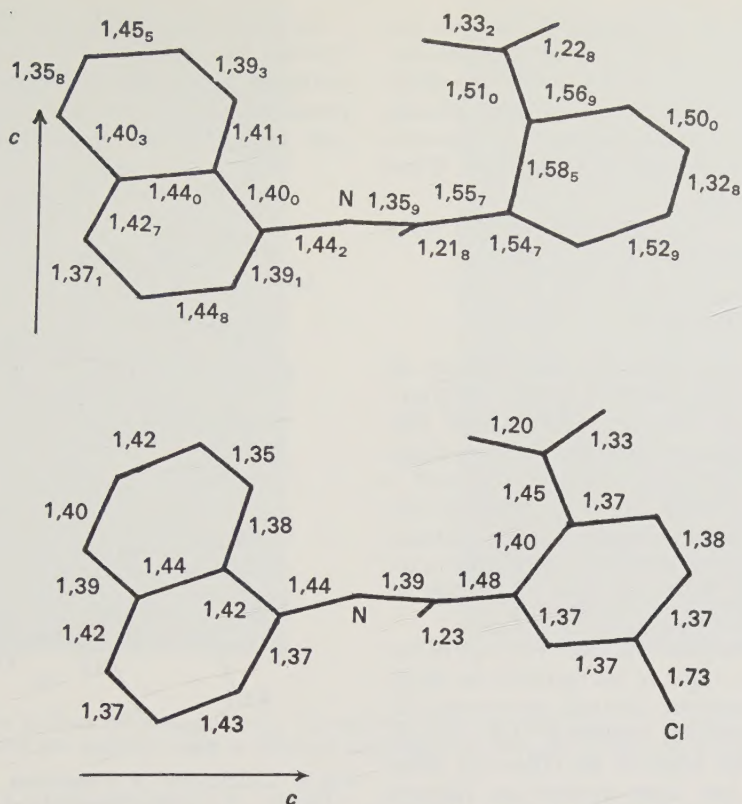


Fig.4. Longueur en Å des liaisons pour l'acide *N*-α-naphtyl-tétrahydro-1,2,3,6-phtalamique (haut) et pour l'acide *N*-α-naphtyl-chloro-4-phtalamique (bas).

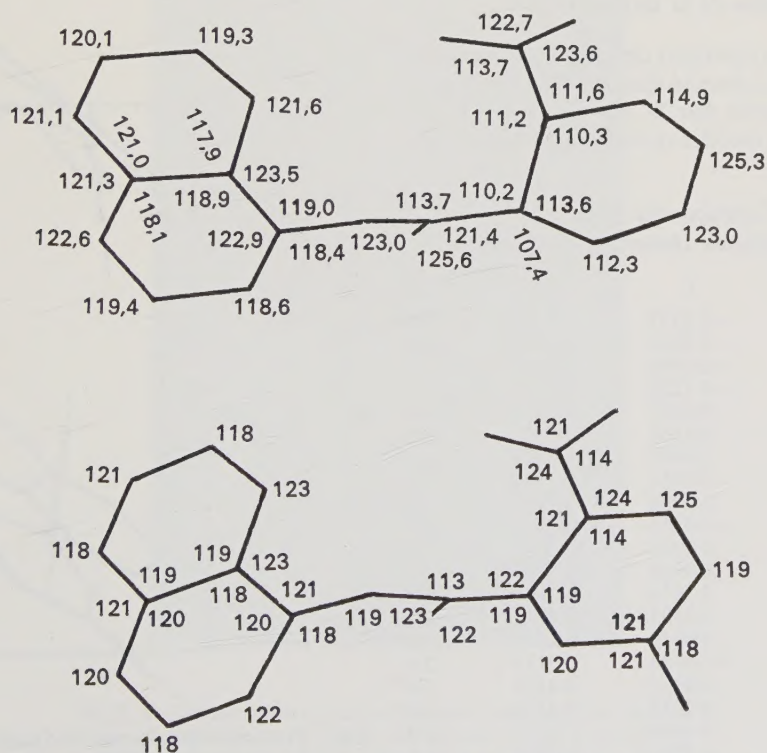


Fig.5. Angles en degrés des liaisons pour l'acide *N*-α-naphtyl-tétrahydro-1,2,3,6-phthalamique (haut) et pour l'acide *N*-α-naphtyl-chloro-4-phthalamique (bas).

(a) et (b) (Fig. 1) illustrent cette étape du travail. Les 22 atomes de la molécule étaient ainsi très bien résolus.

La séquence $a=b=-c=-b=+1$ donne une structure voisine mais dont l'unité asymétrique est décalée par rapport aux centres de symétrie. La séquence $a=-b=-c=-d=+1$ conduit à l'obtention d'une unité asymétrique partielle.

Après affinement il a été constaté qu'un seul signe avait été mal déterminé ($200\ 18$, $|E|=1,70$).

Affinement

Les coordonnées atomiques déduites des sections de Fourier à base E ont été affinées au moyen du programme ORXLS de Busing et Lévy sur machine IBM 704. Après sept cycles d'affinement avec des facteurs d'agitation thermique isotropes le coefficient d'accord a pour valeur $R=0,150$ pour les réflexions mesurées non nulles. Les séries différences ne présentent pas de traits remarquables. Les erreurs standard moyennes sont respectivement pour C, N, O de: $0,011\ \text{\AA}$; $0,008\ \text{\AA}$; $0,007\ \text{\AA}$.

Les 15 atomes d'hydrogène ont alors reçu un début d'affinement. La Table 3 donne les facteurs de structure ayant servi à l'affinement. Ceux-ci représentent la presque totalité des intensités recueillies. Un changement de repère ayant été effectué, les réflexions telles que $k+l=2n+1$ ont leur signe inversé par rapport aux résultats de la méthode d'addition symbolique.

Description de la structure

La Fig. 3 indique les projections de l'unité asymétrique selon les axes b et a . La densité électronique finale projetée selon b est illustrée par la photosomme Fig. 2. La Tableau 2 donne la liste des coordonnées atomiques.

Tableau 2. Coordonnées atomiques et facteurs d'agitation thermique isotropes

	x	y	z	B
C(1)	0.2325	-0.2327	0.2773	3.4
C(2)	0.1631	-0.3525	0.2809	4.5
C(3)	0.0527	-0.2994	0.2181	4.9
C(4)	0.0193	-0.1228	0.1597	4.1
C(5)	0.0892	-0.0007	0.1564	3.1
C(6)	0.0545	0.1838	0.0952	4.0
C(7)	0.1208	0.3083	0.0907	4.4
C(8)	0.2305	0.2514	0.1500	3.2
C(9)	0.2652	0.0738	0.2105	2.3
C(10)	0.1985	-0.0529	0.2162	2.5
C(11)	0.4482	0.2090	0.3063	2.2
C(12)	0.5601	0.0968	0.3697	2.1
C(13)	0.6359	0.3158	0.3864	2.8
C(14)	0.7473	0.2594	0.4617	3.3
C(15)	0.7718	0.0916	0.5172	3.1
C(16)	0.6961	-0.0720	0.5134	2.6
C(17)	0.5799	0.0087	0.4455	2.0
C(18)	0.5478	0.2275	0.4712	2.2
O(1)	0.4322	0.4502	0.2953	3.6
O(2)	0.4472	0.2258	0.4325	2.8
O(3)	0.6075	0.3919	0.5235	3.0
N	0.3743	0.0143	0.2686	2.3

La structure cristalline de l'acide N - α -naphtyltétrahydro-1,2,3,6-phtalamique possède une analogie importante avec celle de l'acide N - α -naphtylchloro-4-phtalamique. Les données concernant ce dernier composé indiquées dans la comparaison suivante peuvent

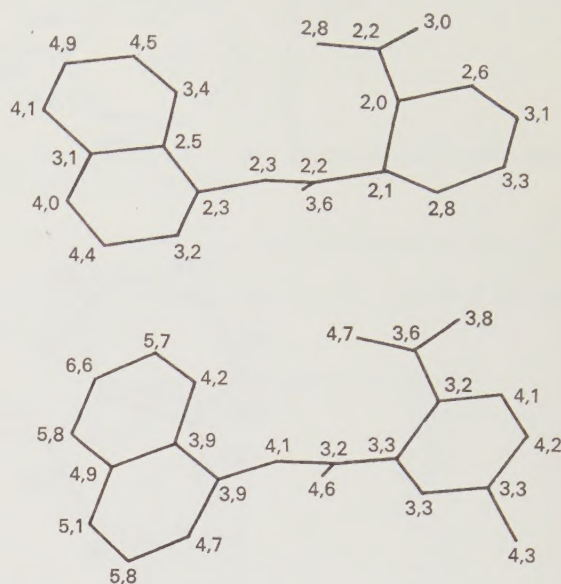


Fig. 6. Coefficients B d'agitation thermique isotrope pour l'acide N - α -naphtyltétrahydro-1,2,3,6-phtalamique (haut) et pour l'acide N - α -naphtylchloro-4-phtalamique (bas).

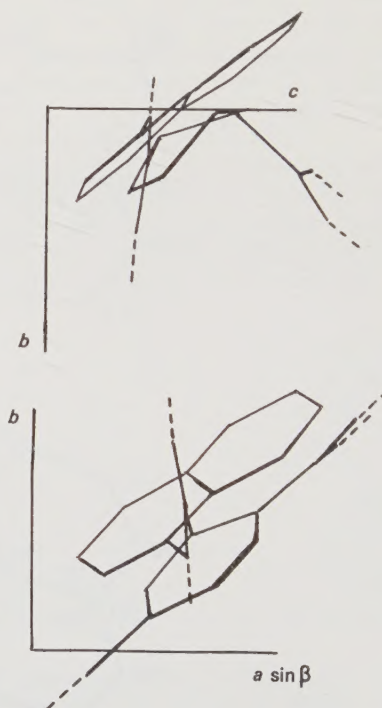
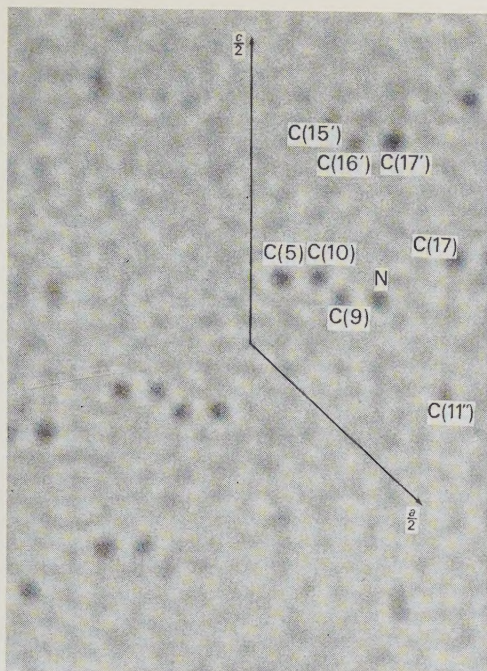
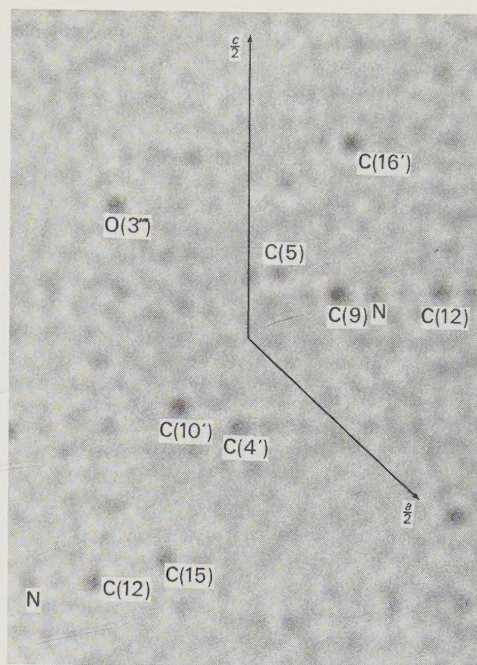


Fig. 7. Projection de la molécule d'acide N - α -naphtyltétrahydro-1,2,3,6-phtalamique selon la normale au plan b,c (haut), projection de la molécule d'acide N - α -naphtylchloro-4-phtalamique selon l'axe c (bas).

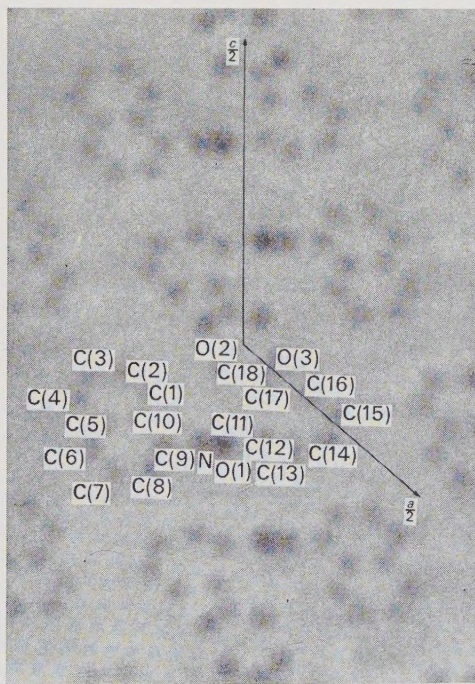


(a)



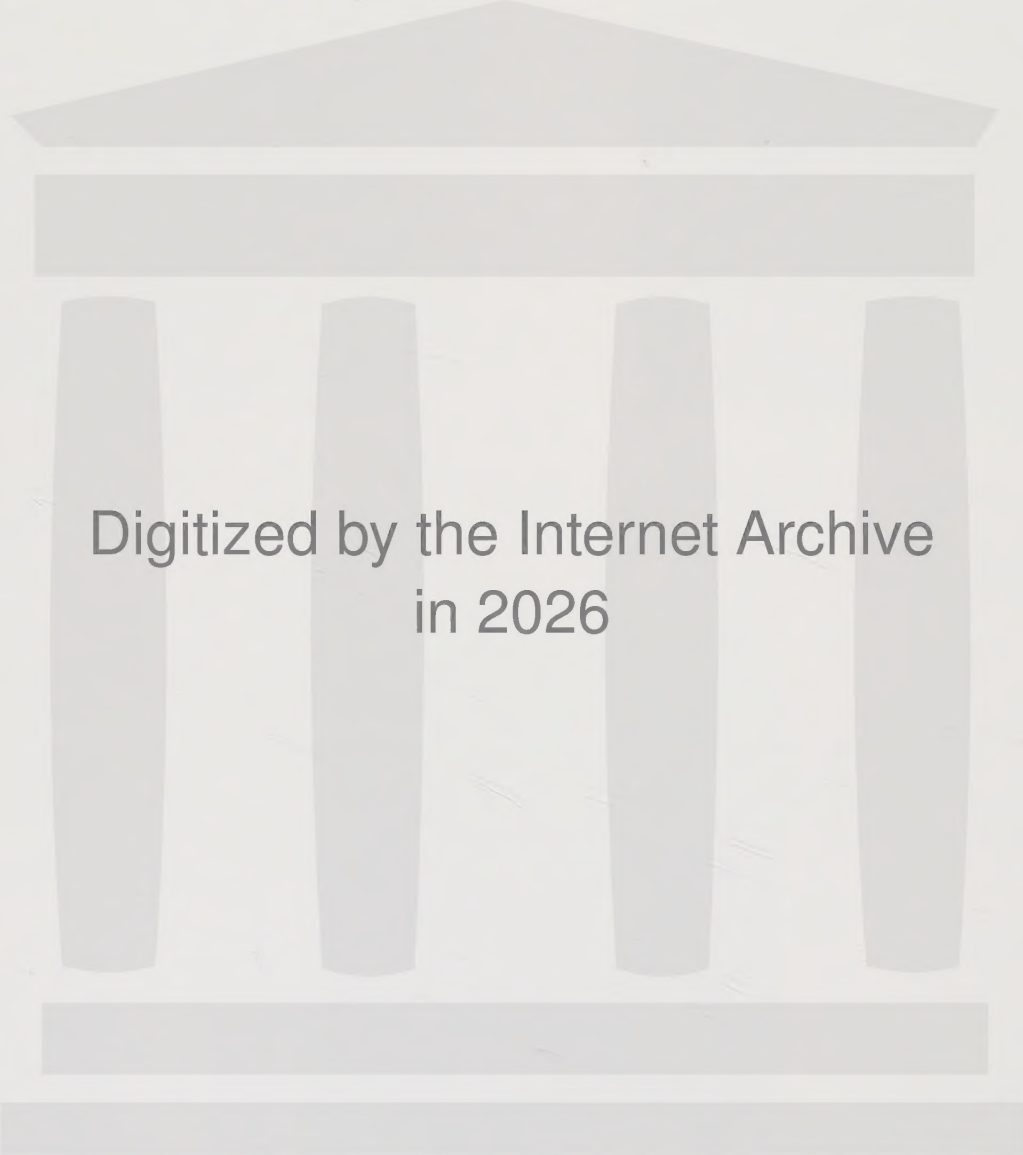
(b)

Fig. 1. Exemples de sections de Fourier photosommées. Ces sections sont normales à l'axe b et obtenues à partir de 367 E dont les signes ont été obtenus par application de la méthode d'addition symbolique. (a) Section $y=0$. (b) Section $y=0,100$.



(c)

Fig. 2. Projection selon l'axe b de la densité électronique obtenue au photosommateur après affinement. (Un changement d'origine $0+\frac{1}{2}, 0, 0+\frac{1}{2}$ est effectué par rapport aux photosommes (a) et (b) (Fig. 1).



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41551519_0028

Les strates $h0l$, $h1l$, $h2l$, $h3l$, $h4l$, ne sont pas placées à l'échelle absolue. Les facteurs d'échelle indiqués multiplient l'échelle absolue. Le signe $\neq$ doit être lu $-$.

[illegible]

Table 3 (suite)

#2	1	10	8.4	8.5	#8	1	7	15.3	14.1	#13	1	11	3.8	84.9	#18	1	16	8.1	7.8	3	2	13	3.6	#20	0			
#2	1	11	20.1	19.1	#8	1	8	19.2	18.2	#13	1	12	0	0.6	#18	1	17	4.6	5.8	3	2	14	6.0	#20	0			
#2	1	12	14.4	#12.0	#8	1	9	25.8	25.0	#13	1	13	8.8	89.8	#18	1	18	5.1	5.1	3	2	15	7.0	#20	0			
#2	1	13	4.0	#7	#8	1	10	4.3	2.6	#13	1	14	7.1	1.7	#18	1	19	4.0	4.0	3	2	16	4.7	#20	0			
#2	1	14	14.5	#15.2	#8	1	11	6.5	84.8	#13	1	15	1.7	22.0	#18	1	20	0	0	3	2	17	0	#20	0			
#2	1	15	0	#1.8	#8	1	12	0	-7	#13	1	16	2.8	1.7	#18	1	21	4.6	6.0	4	2	0	24.4	#22.3	0			
#2	1	16	2.0	3.7	#8	1	13	0.3	87.7	#13	1	17	1.6	7.8	#18	1	22	0	0	4	2	0	15.5	11.3	0			
#2	1	17	0	#1.7	#8	1	14	0.3	89.9	#13	1	18	0.3	6.2	#18	1	23	0	0	4	2	0	1.6	0	0			
#2	1	18	2.8	82.3	#8	1	15	4.3	3.3	#13	1	19	6.9	87.2	#18	1	24	0	0	4	2	0	3	0	0			
#2	1	19	4.7	84.0	#8	1	16	20.6	21.5	#13	1	20	8.2	89.1	#18	1	25	0	0	4	2	0	5.0	0	0			
#2	1	20	3.3	2.7	#8	1	17	4.1	85.0	#13	1	21	5.3	6.1	#18	1	26	2.5	1.0	4	2	0	3.2	1.6	0			
#2	1	21	3.2	3.8	#8	1	18	4.5	86.5	#13	1	22	0	1.7	#18	1	27	2.4	22.5	4	2	0	4.4	5.0	0			
#2	1	22	0	-1	#8	1	19	3.7	85.0	#13	1	23	7.6	87.6	#18	1	28	0	0	4	2	0	9.6	6.5	0			
#2	1	23	5.7	86.6	#8	1	20	4.1	86.4	#13	1	24	0	0	#18	1	29	0	0	4	2	0	8.3	6.7	0			
#2	1	24	0	0	#8	1	21	6.3	86.5	#13	1	25	3.5	3.7	#18	1	30	0	0	4	2	0	8.3	7.8	0			
#2	1	25	17.9	15.8	#8	1	22	0	1.0	#13	1	26	0	0	#18	1	31	0	0	4	2	0	2.9	8.9	0			
#2	1	26	3.5	87.4	#8	1	23	3.8	87.4	#13	1	27	0	0	#18	1	32	0	0	4	2	0	9.3	9.0	0			
#2	1	27	12.7	#10.8	#8	1	24	0	-7	#13	1	28	2.3	#17.7	#18	1	33	0	0	4	2	0	12.6	12.9	0			
#2	1	28	6.9	#70.5	#8	1	25	0	8.0	#14	1	1	2.1	82.7	#18	1	34	0	0	4	2	0	2.1	1.7	0			
#2	1	29	6.6	89.7	#8	1	26	0	0	#14	1	2	0	0	#18	1	35	0	0	4	2	0	3.5	3.7	0			
#2	1	30	3.7	86.2	#8	1	27	2.8	87.8	#14	1	3	0	0	#18	1	36	0	0	4	2	0	4.1	3.7	0			
#2	1	31	8	40.2	#8	1	28	0	85.7	#14	1	4	0	0	#18	1	37	0	0	4	2	0	1.2	1.2	0			
#2	1	32	0	#70.1	#8	1	29	7	84.8	#14	1	5	1.7	2.1	#18	1	38	0	0	4	2	0	9.6	6.5	0			
#2	1	33	10	21.3	#8	1	30	11.8	#10.4	#14	1	6	1.7	#10.0	#18	1	39	0	0	4	2	0	9.0	8.7	0			
#2	1	34	11	24.5	#22.8	#8	1	31	3.2	1.8	#14	1	7	0	0	#18	1	40	0	0	4	2	0	7.5	87.0	0		
#2	1	35	6.7	8.9	#8	1	32	12.4	10.8	#14	1	8	15.1	#15.2	#18	1	41	0	0	4	2	0	2.6	81.0	0			
#2	1	36	3.1	0	#8	1	33	6	10.9	10.0	#14	1	9	11.7	0	#18	1	42	0	0	4	2	0	7.7	7.0	0		
#2	1	37	10.1	9.5	#8	1	34	7.8	88.0	#14	1	10	2.8	82.7	#18	1	43	0	0	4	2	0	5.6	86.5	0			
#2	1	38	15	6.7	#8	1	35	8	87.2	88.6	#14	1	11	5.6	88.0	#18	1	44	0	0	4	2	0	8.4	8.0	0		
#2	1	39	16	0	#1.3	#8	1	36	0	0	#14	1	12	3.2	7	#18	1	45	0	0	4	2	0	5.2	3.8	0		
#2	1	40	17	8.2	88.2	#8	1	37	0	-3	#14	1	13	7.3	11.1	#18	1	46	0	0	4	2	0	6.1	5.0	0		
#2	1	41	18	0	#1.8	#8	1	38	11.2	8.5	#14	1	14	5.7	7.8	#18	1	47	0	0	4	2	0	4.7	4.7	0		
#2	1	42	19	3.2	88.7	#8	1	39	12.5	8.5	#14	1	15	2.6	2.6	#18	1	48	0	0	4	2	0	4.5	4.5	0		
#2	1	43	20	7.2	6.4	#8	1	40	13.1	8.9	#14	1	16	12.7	14.5	#18	1	49	0	0	4	2	0	2.5	2.5	0		
#2	1	44	21	3.3	#5.1	#8	1	41	14	0	#14	1	17	0	0	#18	1	50	0	0	4	2	0	0	0	0		
#2	1	45	22	5.8	8.9	#8	1	42	15	13.6	#14	1	18	0	0	#18	1	51	0	0	4	2	0	0	0	0		
#2	1	46	23	0	#1.2	#8	1	43	16	14.3	13.0	#14	1	19	7.7	10.4	#18	1	52	0	0	4	2	0	2.3	2.3	0	
#2	1	47	24	0	#1.1	#8	1	44	17	2.7	5.1	#14	1	20	8.9	10.0	#18	1	53	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	48	25	2.7	8.4	#8	1	45	18	0	-8.1	#14	1	21	5.6	8.8	#18	1	54	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	49	26	3.8	82.4	#8	1	46	19	4.0	5.5	#14	1	22	0	0	#18	1	55	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	50	27	0	8.3	#8	1	47	20	0	5.5	#14	1	23	7.4	7.7	#18	1	56	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	51	28	0	8.3	#8	1	48	21	4.0	5.5	#14	1	24	2.1	2.6	#18	1	57	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	52	29	0	8.3	#8	1	49	22	0	5.5	#14	1	25	1.4	1.4	#18	1	58	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	53	30	0	8.3	#8	1	50	23	0	5.5	#14	1	26	1.1	1.1	#18	1	59	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	54	31	0	8.3	#8	1	51	24	0	5.5	#14	1	27	10.9	11.9	#18	1	60	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	55	32	0	8.3	#8	1	52	25	0	5.5	#14	1	28	0	0	#18	1	61	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	56	33	0	8.3	#8	1	53	26	0	5.5	#14	1	29	1.2	1.2	#18	1	62	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	57	34	0	8.3	#8	1	54	27	0	5.5	#14	1	30	0	0	#18	1	63	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	58	35	0	8.3	#8	1	55	28	0	5.5	#14	1	31	0	0	#18	1	64	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	59	36	0	8.3	#8	1	56	29	0	5.5	#14	1	32	0	0	#18	1	65	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	60	37	0	8.3	#8	1	57	30	0	5.5	#14	1	33	0	0	#18	1	66	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	61	38	0	8.3	#8	1	58	31	0	5.5	#14	1	34	0	0	#18	1	67	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	62	39	0	8.3	#8	1	59	32	0	5.5	#14	1	35	0	0	#18	1	68	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	63	40	0	8.3	#8	1	60	33	0	5.5	#14	1	36	0	0	#18	1	69	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	64	41	0	8.3	#8	1	61	34	0	5.5	#14	1	37	0	0	#18	1	70	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	65	42	0	8.3	#8	1	62	35	0	5.5	#14	1	38	0	0	#18	1	71	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	66	43	0	8.3	#8	1	63	36	0	5.5	#14	1	39	0	0	#18	1	72	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	67	44	0	8.3	#8	1	64	37	0	5.5	#14	1	40	0	0	#18	1	73	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	68	45	0	8.3	#8	1	65	38	0	5.5	#14	1	41	0	0	#18	1	74	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	69	46	0	8.3	#8	1	66	39	0	5.5	#14	1	42	0	0	#18	1	75	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	70	47	0	8.3	#8	1	67	40	0	5.5	#14	1	43	0	0	#18	1	76	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	71	48	0	8.3	#8	1	68	41	0	5.5	#14	1	44	0	0	#18	1	77	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	72	49	0	8.3	#8	1	69	42	0	5.5	#14	1	45	0	0	#18	1	78	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	73	50	0	8.3	#8	1	70	43	0	5.5	#14	1	46	0	0	#18	1	79	0	0	4	2	0	0	0	0	
#2	1	74	51	0	8.3	#8	1																					

Table 3 (suite)

#1	2	30	1.6	1.7	#7	2	25	1.4	#13	2	10	8.4	8.6	#19	2	5	1.2	#17	2	5	1.7	5	3	12	2.9	#16	2	20	1.6
#1	2	21	1.7	1.8	#8	2	2	2.2	#14	2	11	8.4	8.6	#20	2	6	1.2	#18	2	6	1.7	5	3	13	2.9	#17	2	21	1.6
#2	2	12	1.7	1.8	#9	2	3	2.0	#15	2	12	8.4	8.6	#21	2	7	1.2	#19	2	7	1.7	5	3	14	2.9	#18	2	22	1.6
#3	2	13	1.7	1.8	#10	2	4	1.9	#16	2	13	8.4	8.6	#22	2	8	1.2	#20	2	8	1.7	5	3	15	2.9	#19	2	23	1.6
#4	2	14	1.7	1.8	#11	2	5	1.8	#17	2	14	8.4	8.6	#23	2	9	1.2	#21	2	9	1.7	5	3	16	2.9	#20	2	24	1.6
#5	2	15	1.7	1.8	#12	2	6	1.7	#18	2	15	8.4	8.6	#24	2	10	1.2	#22	2	10	1.7	5	3	17	2.9	#21	2	25	1.6
#6	2	16	1.7	1.8	#13	2	7	1.6	#19	2	16	8.4	8.6	#25	2	11	1.2	#23	2	11	1.7	5	3	18	2.9	#22	2	26	1.6
#7	2	17	1.7	1.8	#14	2	8	1.5	#20	2	17	8.4	8.6	#26	2	12	1.2	#24	2	12	1.7	5	3	19	2.9	#23	2	27	1.6
#8	2	18	1.7	1.8	#15	2	9	1.4	#21	2	18	8.4	8.6	#27	2	13	1.2	#25	2	13	1.7	5	3	20	2.9	#24	2	28	1.6
#9	2	19	1.7	1.8	#16	2	10	1.3	#22	2	19	8.4	8.6	#28	2	14	1.2	#26	2	14	1.7	5	3	21	2.9	#25	2	29	1.6
#10	2	20	1.7	1.8	#17	2	11	1.2	#23	2	20	8.4	8.6	#29	2	15	1.2	#27	2	15	1.7	5	3	22	2.9	#26	2	30	1.6
#11	2	21	1.7	1.8	#18	2	12	1.1	#24	2	21	8.4	8.6	#30	2	16	1.2	#28	2	16	1.7	5	3	23	2.9	#27	2	31	1.6
#12	2	22	1.7	1.8	#19	2	13	1.0	#25	2	22	8.4	8.6	#31	2	17	1.2	#29	2	17	1.7	5	3	24	2.9	#28	2	32	1.6
#13	2	23	1.7	1.8	#20	2	14	0.9	#26	2	23	8.4	8.6	#32	2	18	1.2	#30	2	18	1.7	5	3	25	2.9	#29	2	33	1.6
#14	2	24	1.7	1.8	#21	2	15	0.8	#27	2	24	8.4	8.6	#33	2	19	1.2	#31	2	19	1.7	5	3	26	2.9	#30	2	34	1.6
#15	2	25	1.7	1.8	#22	2	16	0.7	#28	2	25	8.4	8.6	#34	2	20	1.2	#32	2	20	1.7	5	3	27	2.9	#31	2	35	1.6
#16	2	26	1.7	1.8	#23	2	17	0.6	#29	2	26	8.4	8.6	#35	2	21	1.2	#33	2	21	1.7	5	3	28	2.9	#32	2	36	1.6
#17	2	27	1.7	1.8	#24	2	18	0.5	#30	2	27	8.4	8.6	#36	2	22	1.2	#34	2	22	1.7	5	3	29	2.9	#33	2	37	1.6
#18	2	28	1.7	1.8	#25	2	19	0.4	#31	2	28	8.4	8.6	#37	2	23	1.2	#35	2	23	1.7	5	3	30	2.9	#34	2	38	1.6
#19	2	29	1.7	1.8	#26	2	20	0.3	#32	2	29	8.4	8.6	#38	2	24	1.2	#36	2	24	1.7	5	3	31	2.9	#35	2	39	1.6
#20	2	30	1.7	1.8	#27	2	21	0.2	#33	2	30	8.4	8.6	#39	2	25	1.2	#37	2	25	1.7	5	3	32	2.9	#36	2	40	1.6
#21	2	31	1.7	1.8	#28	2	22	0.1	#34	2	31	8.4	8.6	#40	2	26	1.2	#38	2	26	1.7	5	3	33	2.9	#37	2	41	1.6
#22	2	32	1.7	1.8	#29	2	23	0.0	#35	2	32	8.4	8.6	#41	2	27	1.2	#39	2	27	1.7	5	3	34	2.9	#38	2	42	1.6
#23	2	33	1.7	1.8	#30	2	24	0.0	#36	2	33	8.4	8.6	#42	2	28	1.2	#40	2	28	1.7	5	3	35	2.9	#39	2	43	1.6
#24	2	34	1.7	1.8	#31	2	25	0.0	#37	2	34	8.4	8.6	#43	2	29	1.2	#41	2	29	1.7	5	3	36	2.9	#40	2	44	1.6
#25	2	35	1.7	1.8	#32	2	26	0.0	#38	2	35	8.4	8.6	#44	2	30	1.2	#42	2	30	1.7	5	3	37	2.9	#41	2	45	1.6
#26	2	36	1.7	1.8	#33	2	27	0.0	#39	2	36	8.4	8.6	#45	2	31	1.2	#43	2	31	1.7	5	3	38	2.9	#42	2	46	1.6
#27	2	37	1.7	1.8	#34	2	28	0.0	#40	2	37	8.4	8.6	#46	2	32	1.2	#44	2	32	1.7	5	3	39	2.9	#43	2	47	1.6
#28	2	38	1.7	1.8	#35	2	29	0.0	#41	2	38	8.4	8.6	#47	2	33	1.2	#45	2	33	1.7	5	3	40	2.9	#44	2	48	1.6
#29	2	39	1.7	1.8	#36	2	30	0.0	#42	2	39	8.4	8.6	#48	2	34	1.2	#46	2	34	1.7	5	3	41	2.9	#45	2	49	1.6
#30	2	40	1.7	1.8	#37	2	31	0.0	#43	2	40	8.4	8.6	#49	2	35	1.2	#47	2	35	1.7	5	3	42	2.9	#46	2	50	1.6
#31	2	41	1.7	1.8	#38	2	32	0.0	#44	2	41	8.4	8.6	#50	2	36	1.2	#48	2	36	1.7	5	3	43	2.9	#47	2	51	1.6
#32	2	42	1.7	1.8	#39	2	33	0.0	#45	2	42	8.4	8.6	#51	2	37	1.2	#49	2	37	1.7	5	3	44	2.9	#48	2	52	1.6
#33	2	43	1.7	1.8	#40	2	34	0.0	#46	2	43	8.4	8.6	#52	2	38	1.2	#50	2	38	1.7	5	3	45	2.9	#49	2	53	1.6
#34	2	44	1.7	1.8	#41	2	35	0.0	#47	2	44	8.4	8.6	#53	2	39	1.2	#51	2	39	1.7	5	3	46	2.9	#50	2	54	1.6
#35	2	45	1.7	1.8	#42	2	36	0.0	#48	2	45	8.4	8.6	#54	2	40	1.2	#52	2	40	1.7	5	3	47	2.9	#51	2	55	1.6
#36	2	46	1.7	1.8	#43	2	37	0.0	#49	2	46	8.4	8.6	#55	2	41	1.2	#53	2	41	1.7	5	3	48	2.9	#52	2	56	1.6
#37	2	47	1.7	1.8	#44	2	38	0.0	#50	2	47	8.4	8.6	#56	2	42	1.2	#54	2	42	1.7	5	3	49	2.9	#53	2	57	1.6
#38	2	48	1.7	1.8	#45	2	39	0.0	#51	2	48	8.4	8.6	#57	2	43	1.2	#55	2	43	1.7	5	3	50	2.9	#54	2	58	1.6
#39	2	49	1.7	1.8	#46	2	40	0.0	#52	2	49	8.4	8.6	#58	2	44	1.2	#56	2	44	1.7	5	3	51	2.9	#55	2	59	1.6
#40	2	50	1.7	1.8	#47	2	41	0.0	#53	2	50	8.4	8.6	#59	2	45	1.2	#57	2	45	1.7	5	3	52	2.9	#56	2	60	1.6
#41	2	51	1.7	1.8	#48	2	42	0.0	#54	2	51	8.4	8.6	#60	2	46	1.2	#58	2	46	1.7	5	3	53	2.9	#57	2	61	1.6
#42	2	52	1.7	1.8	#49	2	43	0.0	#55	2	52	8.4	8.6	#61	2	47	1.2	#59	2	47	1.7	5	3	54	2.9	#58	2	62	1.6
#43	2	53	1.7	1.8	#50	2	44	0.0	#56	2	53	8.4	8.6	#62	2	48	1.2	#60	2	48	1.7	5	3	55	2.9	#59	2	63	1.6
#44	2	54	1.7	1.8	#51	2	45	0.0	#57	2	54	8.4	8.6	#63	2	49	1.2	#61	2	49	1.7	5	3	56	2.9	#60	2	64	1.6
#45	2	55	1.7	1.8	#52	2	46	0.0	#58	2	55	8.4	8.6	#64	2	50	1.2	#62	2	50	1.7	5	3	57	2.9	#61	2	65	1.6
#46	2	56	1.7	1.8	#53	2	47	0.0	#59	2	56	8.4	8.6	#65	2	51	1.2	#63	2	51	1.7	5	3	58	2.9	#62	2	66	1.6
#47	2	57	1.7	1.8	#54	2	48	0.0	#60	2	57	8.4	8.6	#66	2	52	1.2	#64	2	52	1.7	5	3	59	2.9	#63	2	67	1.6
#48	2	58	1.7	1.8	#55	2	49	0.0	#61	2	58	8.4	8.6	#67	2	53	1.2	#65	2	53	1.7	5	3	60	2.9	#64	2	68	1.6
#49	2	59	1.7	1.8	#56	2	50	0.0	#62	2	59	8.4	8.6	#68	2	54	1.2	#66	2	54	1.7	5	3	61	2.9	#65	2	69	1.6
#50	2	60	1.7	1.8	#57	2	51	0.0	#63	2	60	8.4	8.6	#69	2	55	1.2	#67	2	55	1.7	5	3	62	2.9	#66	2	70	1.6
#51	2	61	1.7	1.8	#58	2	52	0.0	#64	2	61	8.4	8.6	#70	2	56	1.2	#68	2	56	1.7	5	3	63	2.9	#67	2	71	1.6
#52	2	62	1.7	1.8	#59	2	53	0.0	#65	2	62	8.4	8.6	#71	2	57	1.2	#69	2	57	1.7	5	3	64	2.9	#68	2	72	1.6
#53	2	63	1.7	1.8	#60	2	54	0.0	#66	2	63	8.4	8.6	#72	2	58	1.2	#70	2	58	1.7	5	3	65	2.9	#69	2	73	1.6
#54	2	64	1.7	1.8	#61	2	55	0.0	#67	2	64	8.4	8.6	#73	2	59	1.2	#71	2	59	1.7	5	3	66	2.9	#70	2	74	1.6
#55	2	65	1.7	1.8	#62	2	56	0.0	#68	2	65	8.4	8.6	#74	2	60	1.2	#72	2	60	1.7	5	3	67	2.9	#71	2	75	1.6
#56	2	66	1.7	1.8	#63	2	57	0.0	#69	2	66	8.4	8.6	#75	2	61	1.2	#73	2	61	1.7	5	3	68	2.9	#7			

Table 3 (suite)

#4	3	6	5.0	#4.7	#10	3	8	2.3	1.0	#16	3	4	1.4	#17	4	4	2	2.7	7.7	#4	4	18	.0	#7
#4	3	7	1.2	1.2	#10	3	9	2.5	#23	#16	3	5	2.5	2.2	4	4	3	4.2	3.0	#4	4	19	1.6	1.8
#4	3	8	6.8	#2.5	#10	3	10	5.6	2.0	#16	3	6	1.0	2.0	4	4	6	6.2	5.5	#4	4	20	1.2	#1.9
#4	3	9	3.0	4.0	#10	3	11	.0	5.8	#16	3	7	1.3	#17	4	4	8	4.0	2.1	#5	4	1	7.2	5.1
#4	3	10	1.0	1.3	#10	3	12	.0	8.1	#16	3	8	.0	8.7	4	4	6	6.5	4.7	#5	4	2	7.2	5.1
#4	3	11	11.8	#12.5	#10	3	13	.0	#16	#16	3	9	1.0	1.7	4	4	7	4.1	#2.8	#5	4	3	7.7	#7.8
#4	3	12	2.5	#6.5	#10	3	14	.0	8.1	#16	3	10	1.7	1.0	4	4	8	2.7	1.6	#5	4	4	5.8	#6.8
#4	3	13	5.6	#7.3	#10	3	15	.0	.7	#16	3	11	2.0	1.2	4	4	9	2.4	1.5	#5	4	5	6.7	7.3
#4	3	14	11.8	#10.8	#10	3	16	.0	1.6	#16	3	12	1.3	#2.6	4	4	10	2.2	3.1	#5	4	6	6.0	7.0
#4	3	15	3.7	#2.9	#10	3	17	.0	#2	#16	3	13	1.5	1.5	4	4	10	2.0	2.7	#5	4	6	6.5	#7.0
#4	3	16	4.1	3.5	#10	3	18	.0	1.1	#16	3	14	1.1	1.8	4	4	12	2.1	#1.5	#5	4	7	.8	#2.7
#4	3	17	6.7	6.7	#10	3	19	1.7	1.0	#16	3	15	1.5	1.8	4	4	13	2.2	2.7	#5	4	8	6.0	#2.2
#4	3	18	1.4	1.3	#10	3	20	1.8	3.0	#16	3	16	.0	1.6	4	4	14	1.5	1.5	#5	4	9	6.0	#2.2
#4	3	19	1.5	#1.9	#10	3	21	.0	4.8	#16	3	17	3.0	#4.0	4	4	15	1.7	#2.7	#5	4	10	4.0	#4.0
#4	3	20	.0	8.5	#10	3	22	.0	.7	#16	3	18	.0	.7	4	4	16	1.5	1.5	#5	4	11	3.5	5.0
#4	3	21	2.0	2.6	#10	3	23	.0	.1	#16	3	19	.0	.1	4	4	17	2.2	#2.2	#5	4	12	1.6	#1.6
#4	3	22	1.6	2.5	#10	3	24	3.3	#1.3	#16	3	20	3.9	3.6	4	4	18	2.3	#1.6	#5	4	13	2.0	#2.2
#5	3	1	17.4	#17.3	#10	3	25	1.2	1.1	#16	3	21	.0	#2.1	4	4	19	2.2	2.7	#5	4	14	6.9	7.2
#5	3	2	.0	8.6	#11	3	1	6.3	6.8	#11	3	2	.0	#2.7	4	4	20	2.0	#2.0	#5	4	15	12.3	15.1
#5	3	3	4.9	3.2	#11	3	2	3.5	#2.9	#11	3	3	2.0	1.9	4	4	21	1.8	1.8	#5	4	16	1.7	#1.3
#5	3	4	2.5	7.6	#11	3	3	3.7	2.7	#11	3	4	2.5	1.9	4	4	22	1.6	1.6	#5	4	17	.0	#1.3
#5	3	5	7.8	#9.7	#11	3	4	5.5	#5.6	#11	3	5	2.5	1.9	4	4	23	1.5	1.5	#5	4	18	.0	.7
#5	3	6	.0	8.6	#11	3	5	7.5	7.8	#11	3	6	4.1	4.5	4	4	24	1.0	1.0	#5	4	19	.0	#1.1
#5	3	7	4.8	#2.0	#11	3	6	1.7	85.0	#11	3	7	1.4	#1.3	4	4	25	1.1	1.1	#5	4	20	1.7	#2.6
#5	3	8	13.4	#12.5	#11	3	7	1.2	.0	#11	3	8	.0	.1	4	4	26	1.0	1.0	#5	4	21	1.7	#2.6
#5	3	9	13.0	12.2	#11	3	8	4.0	5.4	#11	3	9	.0	.1	4	4	27	1.0	1.0	#5	4	22	1.7	#2.6
#5	3	10	4.3	4.6	#11	3	9	11.0	11.0	#11	3	10	.0	.1	4	4	28	1.0	1.0	#5	4	23	1.7	#2.6
#5	3	11	5.7	5.4	#11	3	10	4.4	5.3	#11	3	11	2.2	3.1	4	4	29	1.0	1.0	#5	4	24	1.7	#2.6
#5	3	12	19.8	#23.6	#11	3	11	4.4	5.3	#11	3	12	.0	.4	4	4	30	1.0	1.0	#5	4	25	1.7	#2.6
#5	3	13	.0	8.6	#11	3	12	6.3	7.6	#11	3	13	1.4	1.4	4	4	31	1.0	1.0	#5	4	26	1.7	#2.6
#5	3	14	6.2	#2.7	#11	3	13	.0	.0	#11	3	14	1.7	3.2	4	4	32	1.0	1.0	#5	4	27	1.7	#2.6
#5	3	15	4.5	3.4	#11	3	14	1.7	3.2	#11	3	15	1.5	4.2	4	4	33	1.0	1.0	#5	4	28	1.7	#2.6
#5	3	16	13.3	#11.8	#11	3	15	5.3	4.2	#11	3	16	1.6	9.0	4	4	34	1.0	1.0	#5	4	29	1.7	#2.6
#5	3	17	2.4	#1.8	#11	3	16	1.2	#2.8	#11	3	17	1.7	4.2	4	4	35	1.0	1.0	#5	4	30	1.7	#2.6
#5	3	18	6.5	#5.4	#11	3	17	1.2	4.2	#11	3	18	1.7	4.2	4	4	36	1.0	1.0	#5	4	31	1.7	#2.6
#5	3	19	.0	.0	#11	3	18	1.7	4.2	#11	3	19	1.7	4.2	4	4	37	1.0	1.0	#5	4	32	1.7	#2.6
#5	3	20	1.5	#1.0	#11	3	19	1.7	4.2	#11	3	20	1.7	4.2	4	4	38	1.0	1.0	#5	4	33	1.7	#2.6
#5	3	21	2.6	#1.2	#11	3	20	1.7	4.2	#11	3	21	1.7	4.2	4	4	39	1.0	1.0	#5	4	34	1.7	#2.6
#5	3	22	2.5	#1.2	#11	3	21	1.7	4.2	#11	3	22	1.7	4.2	4	4	40	1.0	1.0	#5	4	35	1.7	#2.6
#5	3	23	1.5	#1.2	#11	3	22	1.7	4.2	#11	3	23	1.7	4.2	4	4	41	1.0	1.0	#5	4	36	1.7	#2.6
#5	3	24	1.5	#1.2	#11	3	23	1.7	4.2	#11	3	24	1.7	4.2	4	4	42	1.0	1.0	#5	4	37	1.7	#2.6
#5	3	25	1.5	#1.2	#11	3	24	1.7	4.2	#11	3	25	1.7	4.2	4	4	43	1.0	1.0	#5	4	38	1.7	#2.6
#5	3	26	1.5	#1.2	#11	3	25	1.7	4.2	#11	3	26	1.7	4.2	4	4	44	1.0	1.0	#5	4	39	1.7	#2.6
#5	3	27	1.5	#1.2	#11	3	26	1.7	4.2	#11	3	27	1.7	4.2	4	4	45	1.0	1.0	#5	4	40	1.7	#2.6
#5	3	28	1.5	#1.2	#11	3	27	1.7	4.2	#11	3	28	1.7	4.2	4	4	46	1.0	1.0	#5	4	41	1.7	#2.6
#5	3	29	1.5	#1.2	#11	3	28	1.7	4.2	#11	3	29	1.7	4.2	4	4	47	1.0	1.0	#5	4	42	1.7	#2.6
#5	3	30	1.5	#1.2	#11	3	29	1.7	4.2	#11	3	30	1.7	4.2	4	4	48	1.0	1.0	#5	4	43	1.7	#2.6
#5	3	31	1.5	#1.2	#11	3	30	1.7	4.2	#11	3	31	1.7	4.2	4	4	49	1.0	1.0	#5	4	44	1.7	#2.6
#5	3	32	1.5	#1.2	#11	3	31	1.7	4.2	#11	3	32	1.7	4.2	4	4	50	1.0	1.0	#5	4	45	1.7	#2.6
#5	3	33	1.5	#1.2	#11	3	32	1.7	4.2	#11	3	33	1.7	4.2	4	4	51	1.0	1.0	#5	4	46	1.7	#2.6
#5	3	34	1.5	#1.2	#11	3	33	1.7	4.2	#11	3	34	1.7	4.2	4	4	52	1.0	1.0	#5	4	47	1.7	#2.6
#5	3	35	1.5	#1.2	#11	3	34	1.7	4.2	#11	3	35	1.7	4.2	4	4	53	1.0	1.0	#5	4	48	1.7	#2.6
#5	3	36	1.5	#1.2	#11	3	35	1.7	4.2	#11	3	36	1.7	4.2	4	4	54	1.0	1.0	#5	4	49	1.7	#2.6
#5	3	37	1.5	#1.2	#11	3	36	1.7	4.2	#11	3	37	1.7	4.2	4	4	55	1.0	1.0	#5	4	50	1.7	#2.6
#5	3	38	1.5	#1.2	#11	3	37	1.7	4.2	#11	3	38	1.7	4.2	4	4	56	1.0	1.0	#5	4	51	1.7	#2.6
#5	3	39	1.5	#1.2	#11	3	38	1.7	4.2	#11	3	39	1.7	4.2	4	4	57	1.0	1.0	#5	4	52	1.7	#2.6
#5	3	40	1.5	#1.2	#11	3	39	1.7	4.2	#11	3	40	1.7	4.2	4	4	58	1.0	1.0	#5	4	53	1.7	#2.6
#5	3	41	1.5	#1.2	#11	3	40	1.7	4.2	#11	3	41	1.7	4.2	4	4	59	1.0	1.0	#5	4	54	1.7	#2.6
#5	3	42	1.5	#1.2	#11	3	41	1.7	4.2	#11	3	42	1.7	4.2	4	4	60	1.0	1.0	#5	4	55	1.7	#2.6
#5	3	43	1.5	#1.2	#11	3	42	1.7	4.2	#11	3	43	1.7	4.2	4	4	61	1.0	1.0	#5	4	56	1.7	#2.6
#5	3	44	1.5	#1.2	#11	3	43	1.7	4.2	#11	3	44	1.7	4.2	4	4	62	1.0	1.0	#5	4	57	1.7	#2.6
#5	3	45	1.5	#1.2	#11	3	44	1.7	4.2	#11	3	45	1.7	4.2	4	4	63	1.0	1.0	#5	4	58	1.7	#2.6
#5	3	46	1.5	#1.2	#11	3	45	1.7	4.2	#11	3	46	1.7	4.2	4	4	64	1.0	1.0	#5	4	59	1.7	#2.6
#5	3	47	1.5	#1.2	#11	3	46	1.7	4.2	#11	3	47	1.7	4.2	4	4	65	1.0	1.0	#5	4	60	1.7	#2.6
#5	3	48	1.5	#1.2	#11	3	47	1.7	4.2	#11	3	48	1.7	4.2	4	4	66	1.0	1.0	#5	4	61	1.7	#2.6
#5	3	49	1.5	#1.2	#11	3	48	1.7	4.2	#11	3	49	1.7	4.2	4	4	67	1.0	1.0	#5	4	62	1.7	#2.6
#5	3	50	1.5	#1.2	#11	3	49	1.7	4.2	#11	3	50	1.7	4.2	4	4	68	1.0	1.0	#5	4	63	1.7	#2.6
#5	3	51	1.5	#1.2	#11	3	50	1.7	4.2	#11	3	51	1.7	4.2	4	4	69	1.0	1.0	#5	4	64	1.7	#2.6
#5																								

Table 3 (suite)

#11	4	12	6,7	7,0
#11	4	13	1,0	1,2
#11	4	14	5,6	6,0
#11	4	15	6,6	6,7
#11	4	16	6,1	5,0
#11	4	17	5,0	5,1
#11	4	18	2,5	6,6
#11	4	19	2,2	6,1
#11	4	20	2,0	6,2
#11	4	21	2,0	5,0
#11	4	22	6,3	6,6
#12	4	1	3,7	3,0
#12	4	2	2,0	6,0
#12	4	3	3,6	6,1
#12	4	4	2,6	6,1
#12	4	5	2,0	3,2
#12	4	6	2,3	3,2
#12	4	7	8,0	6,6
#12	4	8	6,0	6,6
#12	4	9	6,8	6,7
#12	4	10	6,5	6,0
#12	4	11	2,0	6,4
#12	4	12	2,5	6,1
#12	4	13	2,0	6,8
#12	4	14	2,5	6,4
#12	4	15	5,3	5,4
#12	4	16	6,6	6,5
#12	4	17	2,0	6,4
#12	4	18	2,0	6,1
#12	4	19	3,2	2,5
#12	4	20	6,5	2,6
#12	4	21	2,0	6,1
#12	4	22	1,1	6,1
#13	4	1	1,1	6,4
#13	4	2	2,0	6,5
#13	4	3	5,0	6,5
#13	4	4	2,0	6,1
#13	4	5	2,2	1,4
#13	4	6	1,5	1,9
#13	4	7	2,0	6,6
#13	4	8	2,0	6,6
#13	4	9	2,0	6,0
#13	4	10	2,0	6,5
#13	4	11	3,9	6,7
#13	4	12	2,0	6,1
#13	4	13	6,0	6,0
#13	4	14	2,0	6,2
#13	4	15	6,6	6,1
#13	4	16	1,0	6,5
#13	4	17	2,3	6,0
#13	4	18	1,7	1,7
#13	4	19	2,1	6,4
#13	4	20	2,6	6,1
#13	4	21	2,0	1,6
#13	4	22	2,0	1,6
#14	4	1	5,0	6,0
#14	4	2	2,0	2,7
#14	4	3	2,0	2,7
#14	4	4	2,0	6,1
#14	4	5	2,0	6,6
#14	4	6	2,0	6,1
#14	4	7	2,0	6,1
#14	4	8	2,0	6,1
#14	4	9	2,0	6,1
#14	4	10	2,0	6,1
#14	4	11	2,1	1,5
#14	4	12	6,7	6,0
#14	4	13	2,8	6,1
#14	4	14	5,0	5,0
#14	4	15	6,2	7,0
#14	4	16	6,2	3,9
#14	4	17	2,2	2,7
#14	4	18	3,0	6,7
#14	4	19	2,0	6,1
#14	4	20	2,6	2,5
#14	4	21	2,0	6,0
#14	4	22	1,5	6,1
#15	4	6	2,0	6,5
#15	4	7	3,1	6,1
#15	4	8	2,0	6,4
#15	4	9	6,0	6,6
#15	4	10	2,2	6,1
#15	4	11	2,1	6,2
#15	4	12	6,7	6,6
#15	4	13	3,5	1,6
#15	4	14	6,1	6,7
#15	4	15	5,3	15,6
#15	4	16	2,6	1,0
#15	4	17	2,8	6,1
#15	4	18	2,6	1,8
#15	4	19	5,2	6,6
#15	4	20	2,0	6,1
#15	4	21	3,4	6,6
#16	4	9	6,4	6,1
#16	4	10	5,2	6,0
#16	4	11	2,0	1,0
#16	4	12	6,3	3,2
#16	4	13	2,1	6,5
#16	4	14	3,2	2,6
#16	4	15	3,8	5,5
#16	4	16	2,6	6,0
#16	4	17	1,2	6,0
#16	4	18	2,0	6,1
#16	4	19	1,9	6,1
#16	4	20	5,3	6,6
#17	4	11	2,2	6,2
#17	4	12	2,2	6,2
#17	4	13	6,6	6,5
#17	4	14	2,0	6,6
#17	4	15	2,0	6,1
#17	4	16	2,0	6,1
#17	4	17	1,5	6,1

mière approximation parallèles entre eux et inclinés d'un angle de l'ordre de 40° sur la direction de l'axe b dans l'une et dans l'autre structure (Fig. 7). Les enchaînements intermoléculaires assurant la stabilité des deux cristaux sont du même type.

Pour l'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phthalamique une chaîne d'interaction chlore-chlore, acide-acide est renforcée par une chaîne de liaisons hydrogène $N-H \cdots O$ entre molécules de deux mailles voisines dans la direction de l'axe b . Cette disposition se retrouve dans la structure de l'acide *N*- α -naphtyltétrahydro-1,2,3,6-phthalamique, l'interaction chlore-chlore étant omise.

La principale différence entre ces deux composés réside au niveau des groupements acides. Pour l'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phthalamique le groupement acide fait un angle faible et voisin de 10° avec le cycle phényle et donne lieu à une liaison classique $C=O \cdots H-O-C$ de force modérée, l'interaction chlore-chlore tendant à l'affaiblir. Les liaisons carbone-oxygène sont nettement différenciées, localisant ainsi l'hydrogène en la position indiquée sur la Fig. 8. Le groupe acide du composé hydrogéné est quant à lui proche d'être normal au 'plan' du cycle tétrahydrogéné, donc du plan moléculaire moyen. La force de la liaison hydrogène associée est normale; les deux liaisons carbone-oxygène sont également proches des valeurs attendues

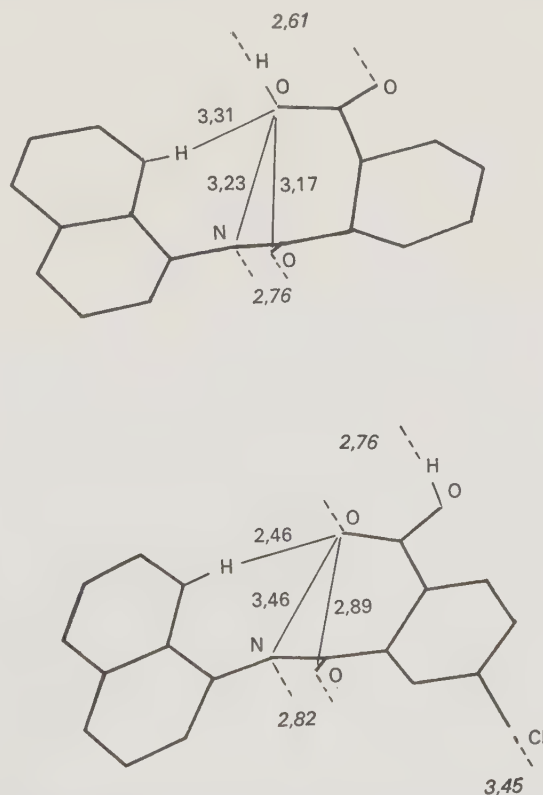


Fig. 8. Configuration du groupement acide pour l'acide *N*- α -naphtyltétrahydro-1,2,3,6-phthalamique (haut) et pour l'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phthalamique (bas). Les valeurs des longueurs des liaisons intermoléculaires fortes sont imprimées en italiques.

donner lieu à de faibles modifications, sa structure fine (très voisine de la symétrie $P2_1/c$) n'ayant pu encore être complètement élucidée.

Ces deux molécules cristallisent dans le groupe $P2_1/c$ avec des paramètres b voisins: 4,81 et 4,97 Å. La molécule d'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phthalamique est allongée dans la direction de l'axe c , celle du second composé l'est suivant une normale à cette direction. Elles ont sensiblement la même forme. Les distances et angles de liaisons apparaissent normaux pour les différentes parties de ces molécules (Figs. 4, 5, 6). Les groupements α -naphtyl sont comparables à ceux déjà décrits (Okaya & Ashida, 1966). Les deux groupements cycliques intervenant dans ces composés sont en pre-

d'une part pour une liaison simple, d'autre part pour une liaison double assignant à l'atome d'hydrogène une position inverse de celle constatée pour l'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phtalamique. L'acide *N*- α -naphtylchloro-4-phtalamique est actif en ce sens qu'il inverse le géotropisme naturel alors que l'acide *N*- α -naphtyl-tétrahydro-1,2,3,6-phtalamique ne l'est pas. Il convient d'attendre la résolution des structures cristallines d'autres acides arylphtalamiques pour envisager une relation structurale entre ces composés et l'hormone dont ils inhibent le transfert, à savoir l'acide β -indolylacétique dont la structure cristalline a été récemment publiée (Karle, Britts & Gum, 1964).

Les corrections préliminaires ont été effectuées sur machine CDC 3600, les autres calculs étant faits à la

main et les séries de Fourier étudiées au photosom-mateur (von Eller, 1955, 1965.)

Références

- ELLER, G. VON (1955). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **78**, 157.
ELLER, G. VON (1965). *Acta Cryst.* **18**, 1000.
KARLE, I. L., BRITTS, K. & GUM, P. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 496.
KARLE, J. & KARLE, I. L. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 849.
MENTZER, C., MOLHO, D. & PACHECO, H. (1950). *Bull. Soc. chim. Biol.* **32**, 572.
MORNON, J. P. (1966). *C.r. Acad. Sci. Paris*, **263**, 286.
MORNON, J. P. (1967). *C.r. Acad. Sci. Paris*, **264**, 192.
OKAYA, Y. & ASHIDA, T. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 461.

